

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна

Ю. А. Бережной

СТРУКТУРА АТОМІВ І МОЛЕКУЛ

НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК

Харків – 2018

УДК 530.145

Б 48

Рецензенти:

Клепиков В. Ф. – директор Інституту електрофізики і радіаційних технологій НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України, член-кореспондент НАН України;

Пилипенко В. В. – провідний науковий співробітник ННЦ ХФТІ НАН України, доктор фіз.-мат. наук.

*Затверджено до друку рішенням Вченої ради
Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна
(протокол № 13 від 17.12.2018 р.)*

Бережной Ю. А.

Б 48

Структура атомів і молекул : навчальний посібник. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2018. – 176 с.

ISBN 978-966-285-549-4

Викладено нерелятивістську і релятивістську теорії структури атомів і молекул. Розглянуто випромінювання чорного тіла, квантування електромагнітного поля, рівняння Дірака та його квазірелятивістське наближення, тонку та надтонку структури атомних рівнів енергії, розщеплення атомних рівнів енергії в електричному та магнітному полях, лембівський зсув атомних рівнів енергії, теорію Гайтлера–Лондона гомеоплярного зв'язку, синглетні та мультиплетні терми двоатомних молекул.

Призначається студентам, аспірантам, викладачам і науковцям фізичних спеціальностей вищих навчальних закладів для поглибленого вивчення квантової структури атомів і молекул.

УДК 530.145

ISBN 978-966-285-549-4

© Харківський національний
університет імені В. Н. Каразіна, 2018
© Бережной Ю. А., 2018
© Правик М. В., макет обкладинки, 2018

З М І С Т

Передмова	4
Розділ 1. Квантові системи частинок	6
1.1. Коротка хроніка атомізму	6
1.2. Рівняння Шредінґера	17
1.3. Спін і спінори	22
1.4. Системи тотожних частинок	30
1.5. Вторинне квантування для систем тотожних бозонів	38
1.6. Вторинне квантування для систем тотожних ферміонів	43
Розділ 2. Нерелятивістська теорія атомів	46
2.1. Електронна структура атомів	46
2.2. Мультипольні моменти	50
2.3. Атом водню	53
2.4. Атом гелію	62
2.5. Самоузгоджене поле	67
2.6. Рівняння Томаса–Фермі	76
2.7. Періодична система елементів Менделєєва	81
2.8. Атом в електричному полі	85
Розділ 3. Релятивістська теорія атомів	89
3.1. Випромінення чорного тіла	89
3.2. Квантування вільного електромагнітного поля	98
3.3. Випромінення фотонів атомами	101
3.4. Рівняння Дірака	109
3.5. Наближений розв'язок рівняння Дірака	113
3.6. Тонка та надтонка структура рівнів енергії атома водню	118
3.7. Тонка та надтонка структура рівнів енергії складних атомів	127
3.8. Рух зарядженої частинки в магнітному полі	131
3.9. Атом у магнітному полі	136
Розділ 4. Молекули	141
4.1. Структура молекул	141
4.2. Адіабатичне наближення	144
4.3. Іонізована молекула водню	146
4.4. Молекула водню	150
4.5. Валентність	156
4.6. Синглетні терми двохатомної молекули	159
4.7. Мультиплетні терми двохатомної молекули	162
4.8. Сили Ван дер Ваальса	167
Додаток. Терми основних станів атомів	171
Список рекомендованої літератури	173
Предметний покажчик	174